

Frankfurt 7- 1968

J Keller

POLARISIERTE MAGNETISCHE VERUNREINIGUNGEN
IN SUPRALEITERN

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Johann Wolfgang Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main

vorgelegt von
Joachim Keller
aus Eltville

Frankfurt am Main, Juni 1968

VERGLEICHENDE ANATOMISCHE VERHANDLUNGEN

VON J. M. S. P. L.

Verlag von J. Neumann, Neudamm

1862

Verhandlungen des Congresses
der Naturwissenschaftlichen Vereine
zu Bonn, 1862
in Frankfurt am Main



Verhandlungen von
J. M. S. P. L.
zu Bonn

Frankfurt am Main, 1862

Gedruckt mit Genehmigung der Naturwissenschaft-
lichen Fakultät der Universität Frankfurt/Main

Dekan: Professor Dr. W. Martienssen
Erster Berichterstatter: Professor Dr. P. Fulde
Zweiter Berichterstatter: Professor Dr. H. Bilz

Tag der mündlichen Prüfung:

5. Juli 1968



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41545303_0038

Inhaltsverzeichnis

I.	Einleitung	1
II.	Modell eines Supraleiters mit statistisch verteilten polarisierten magnetischen Verunreinigungen	3
III.	Berechnung der Greenschen Funktion der Elektronen	8
IV.	Einfluß der Spinpolarisation auf die Übergangstemperatur des Supraleiters	16
V.	Berechnung der kritischen Verunreinigungskonzentration bei $T = 0$	20
VI.	Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung	
VII.	Möglichkeit der Koexistenz von Supraleitung und Ferromagnetismus	26
VIII.	Schlußbemerkungen	27
Anhang A:	Regeln zur Anwendung des Nambuformalismus	28
Anhang B:	Auswertung von Selbstenergiediagrammen mit Verunreinigungspropagatoren	30
	Literaturverzeichnis	32
	Figuren	33

I. Einleitung

Seit den Experimenten der Göttinger Gruppe¹⁾ und von Matthias und seinen Mitarbeitern²⁾ ist es bekannt, daß magnetische Verunreinigungen im Gegensatz zu nichtmagnetischen Verunreinigungen einen starken Einfluß auf die Übergangstemperatur eines Supraleiters haben. Abrikosov und Gorkov³⁾ haben diesen Effekt theoretisch untersucht und gezeigt, daß die Austauschwechselwirkung der Elektronen mit den magnetischen Verunreinigungen zu einem Paarbrechungseffekt und damit zu einer Erniedrigung der Übergangstemperatur und des Ordnungsparameters führt (Figur 1 und 2,a). Die Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen ist bei seltenen Erden als Verunreinigungen insbesondere bei kleinen Verunreinigungskonzentrationen recht gut⁴⁾. Matthias und Mitarbeiter⁵⁾, Crow und Parks⁶⁾ fanden jedoch an den Systemen La:Gd, bzw. La₃In:Gd charakteristische Abweichungen bei tiefen Temperaturen in der Nähe der kritischen Verunreinigungskonzentration (Figur 1).

Matthias und Mitarbeiter haben an dem System La:Gd auch magnetische Messungen vorgenommen und fanden in diesem Konzentrations-Temperaturbereich ein Maximum der Suszeptibilität. Das läßt darauf schließen, daß die Abweichungen im Verlauf der Übergangstemperatur durch magnetische Eigenschaften des Systems, eventuell durch den Übergang zu einem magnetischen Ordnungszustand verursacht werden.

Diese Frage und insbesondere die Möglichkeit einer Koexistenz von Supraleitung und Verunreinigungsferromagnetismus ist inzwischen an mehreren Systemen untersucht worden⁷⁾. Auf den ersten Blick scheint eine Koexistenz der beiden Phasen unmöglich zu sein, da die Polarisation der Leitungselektronen durch das innere Feld der Cooperpaarung nach der BCS-Theorie entgegenwirkt.

Wir haben daher mit einem einfachen Modell für den magnetischen Zustand des Systems den Einfluß der Polarisation der Verunreinigungen und Leitungselektronen auf die Übergangstemperatur und die kritische Verunreinigungskonzentration untersucht. Es zeigt sich, daß durch die Dynamik der Verunreinigungsspins der Paarbrechungseffekt des inneren Feldes und der Streuung an den magnetischen Verunreinigungen so weit reduziert wird, daß die kritische Verunreinigungskonzentration bei $T=0$ im magnetischen Zustand sogar größer sein kann als nach der Theorie von Abrikosov und Gorkov für paramagnetische Verunreinigungen. Dieser Effekt wird noch durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung der Elektronen verstärkt. Der Einfluß der Spindynamik auf den Paarbrechungseffekt der Verunreinigungen wurde schon von Bennemann⁸⁾ untersucht, allerdings unter etwas anderen Voraussetzungen über den magnetischen Zustand des Systems. Mit der auch hier verwendeten Molekularfeldnäherung hat Takano⁹⁾ den Verlauf der Übergangstemperatur in der Nähe des magnetischen Übergangs unter Vernachlässigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung berechnet. Wir finden eine qualitative Übereinstimmung mit seinen Ergebnissen.

II. Modell eines Supraleiters mit statistisch verteilten polarisierten magnetischen Verunreinigungen.

Den supraleitende Zustand behandeln wir im Rahmen des BCS-Modells. Zur Beschreibung des magnetischen Zustands des Systems aus Elektronen und magnetischen Verunreinigungen verwenden wir eine Molekularfeldnäherung. Die Wechselwirkung der Elektronen mit den magnetischen Verunreinigungen beschreiben wir nach Kondo durch eine Wechselwirkung zwischen Elektronen- und Verunreinigungs-spins und berechnen ihren Einfluß auf die Eigenschaften des Supraleiters mit Hilfe einer selbstkonsistenten Störungsrechnung in 2. Ordnung.

In dieser Näherung ist der Kondoeffekt nicht enthalten; damit sind jedoch nicht alle störungstheoretischen Schwierigkeiten vermieden, die mit dem zusätzlichen Freiheitsgrad der Verunreinigungen zusammenhängen. Wegen der starken Wirkung der magnetischen Verunreinigungen auf die Eigenschaften eines Supraleiters ist es notwendig, die BCS- und die Verunreinigungswechselwirkung auf gleicher Stufe in selbstkonsistenter Form zu behandeln. Dabei möchte man gern die allgemeinen Begriffe und Formulierungen der Störungstheorie (Selbstenergie, Dysongleichung) verwenden. Wir wollen deshalb nach einer Idee von Götze und Brenig¹⁰⁾ ein Modell für die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Verunreinigungen entwickeln, auf das sich die Standardmethoden der Störungstheorie anwenden lassen und das sich außerdem direkt auf statistisch verteilte Verunreinigungen bezieht. Das Verfahren hat mathematisch große Ähnlichkeit mit der Methode von Abrikosov¹¹⁾, es unterscheidet sich von dieser hauptsächlich in der physikalischen Begründung.

Üblicherweise behandelt man die Wechselwirkung zwischen Elektronen und statistisch verteilten Verunreinigungen so, daß man von festen Positionen der Verunreinigungen im Kristallgitter ausgeht und anschließend über die Verunreinigungspositionen mittelt. Wir betrachten dagegen die Verunreinigungen als ein Gas von Teilchen (Fermionen), das sich im periodischen Potential des Wirtskristalls befindet. Vernachlässigt man die Wechselwirkung der Ver-

unreinigungen untereinander, dann lassen sich die Teilchenzustände nach Gitterimpuls, Bandindex und Spinzustand (bei magn. Verunreinigungen) klassifizieren. Da jedoch die Verunreinigungen im allgemeinen an einer bestimmten Stelle der Elementarzelle stark lokalisiert sind, können wir anstelle des Gitterimpulses ihre Position im Kristallgitter als Quantenzahl einführen. Der Zustand des Verunreinigungsgases wird dann durch die Besetzungszahlen dieser Einteilchenzustände bestimmt. Durch die geeignete Wahl eines chemischen Potenti als läßt es sich erreichen, daß die Teilchendichte der vorgegebenen Verunreinigungskonzentration entspricht. Im Falle starker Lokalisierung sind die Einteilchenzustände N -fach (bei magn. Verunreinigungen $(2S+1) \cdot N$ -fach) entartet, entsprechend der Anzahl der möglichen Positionen im Periodizitätsvolumen. Wir wollen annehmen, daß die Anregungsenergie des ersten Schwingungsniveaus groß gegenüber allen anderen charakteristischen Energien des Problems (Temperatur, Zeemanenergie) ist, so daß wir die Verunreinigungen bezüglich Translationsbewegungen als statisch betrachten können. Das chemische Potential μ ist dann allein durch die Energie ϵ des Grundzustandsbandes, die Temperatur und die Verunreinigungskonzentration c bestimmt.

Für nichtmagnetische Verunreinigungen gilt:

$$N \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_1 - \mu_1)} + 1} = n_1 = N \cdot c_1$$

Durch die vorausgesetzte Fermistatistik für die Verunreinigungsteilchen ist dafür gesorgt, daß sich nicht mehr als eine Verunreinigung am gleichen Ort, im gleichen Band und gleichen Spinzustand befindet. Unter der Annahme eines großen Bandabstandes bedeutet das für die nichtmagnetischen Verunreinigungen, daß an einem Gitterplatz höchstens eine Verunreinigung sitzen kann. Bei magnetischen Verunreinigungen ist das nicht der Fall.

Im Rahmen dieses Formalismus ist es möglich, daß ein Gitterplatz von zwei Verunreinigungen mit verschiedenem Spinzustand besetzt ist. Bei kleinen Verunreinigungskonzentrationen ist die Wahrscheinlichkeit dafür jedoch gering, so daß wir den Beitrag dieser unphysika-

lischen Zustände vernachlässigen können.

Abrikosov führt zur Beschreibung der Spinstreuung an den magnetischen Verunreinigungen ebenfalls ein System von Fermionen ein, allerdings für die Spinzustände einer bestimmten Verunreinigung an einem bestimmten Ort. Er eliminiert die unphysikalischen Zustände dadurch, daß er für die Besetzung jedes Zustandes eine Energie λ einführt und durch den Grenzübergang $\lambda/T \rightarrow \infty$ die mehrfach besetzten Zustände ausfriert. Die mathematische Ähnlichkeit der beiden Methoden liegt darin, daß im Grenzfall kleiner Konzentrationen die Energiedifferenz $\epsilon - \mu \gg T$ wird, so daß die Besetzung der Zustände in beiden Fällen durch eine Boltzmannstatistik beschrieben wird.

Jedem Streuprozess an einer Verunreinigung entspricht nun in diesem Formalismus die Vernichtung eines alten und die Erzeugung eines neuen Verunreinigungszustandes. Das wird durch eine geeignete Formulierung der Wechselwirkung zwischen Verunreinigungen und Elektronen erreicht. Der Spinoperator einer magnetischen Verunreinigung am Ort n ist dabei durch die entsprechenden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren dieser Spinzustände zu ersetzen:

$$\vec{S}_n = b_{n,\beta}^+ \vec{S}_{\beta\beta'} b_{n,\beta'} \quad (2)$$

Auf diese Weise werden die Vertauschungsregeln für die einzelnen Spinkomponenten erfüllt.

Unser Modell wird damit durch den folgende Hamiltonoperator beschrieben (den Beitrag der Spin-Bahn-Wechselwirkung berücksichtigen wir in Teil VI):

$$H = \sum H_i$$

$$H_0 = \sum_{p,s} (\epsilon_p - \mu) c_{p,s}^+ c_{p,s} + \sum_n (\epsilon_n - \mu_n) a_n^+ a_n + \sum_{n,\alpha} (\epsilon_n - \mu_n) b_{n,\alpha}^+ b_{n,\alpha} \quad (3)$$

$$H_1 = \sum_{n,p,p',s} \mathcal{U}_1(p,p') e^{-i(p-p')H_n} a_n^+ a_n c_{p,s}^+ c_{p',s}$$

$$H_2 = \sum_{\substack{n,p,p',s \\ n',\alpha,\alpha',s'}} \mathcal{U}_2(p,p') e^{-i(p-p')H_n} (b_{n,\alpha}^+ \vec{S}_{n,\alpha\alpha'} b_{n,\alpha'}) \cdot (c_{p,s}^+ \vec{\sigma}_{ss'} c_{p',s'})$$

$$H_3 = -g/2 \sum_{p,p',q} c_{p+q,s}^+ c_{p-q,s'}^+ c_{p',s'} c_{p,s}$$

Störungstheorie im Supraleiter.

Es erweist sich für die Rechnung als vorteilhaft, die Elektronenfeldoperatoren zu 4-dim. Nambu-Spinoren zusammenzufassen¹²⁾.

$$\psi_p = \begin{pmatrix} c_{p\uparrow} \\ c_{p\downarrow} \\ c_{p\uparrow}^\dagger \\ c_{p\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \psi_p^\dagger = (c_{p\uparrow}^\dagger, c_{p\downarrow}^\dagger, c_{-p\uparrow}, c_{-p\downarrow}) \quad (4)$$

Dadurch ist es möglich, die Graphentechnik der Störungstheorie in ähnlicher Weise im Supraleiter zu formulieren und anzuwenden wie im normalleitenden Zustand. Entsprechend definieren wir als Greensche Funktion des Elektronensystems die folgende 4x4-Matrix:

$$G_{\mu\nu}(p, \tau) = - \langle T \{ \psi_p^\mu(\tau) \psi_p^{\nu\dagger}(0) \} \rangle \quad (5)$$

Dabei entsprechen den Diagonalelementen die Propagatoren der Ein-Elektronen-Anregungen, den Nebendiagonalelementen die Paaramplituden. Zur Formulierung der Wechselwirkungsoperatoren in diesem Spinraum führen wir ein System von Basismatrizen g_i, σ_k ein. Die Matrizen g_i, σ_k sind Paulimatrizen im Impuls-, bzw. Spinraum der Elektronen. Ihr Produkt sei durch das folgende Beispiel erklärt:

$$g_3 \sigma_2 = \begin{pmatrix} \sigma_2 & \sigma \\ \sigma & -\sigma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma & -i & \sigma & 0 \\ i & \sigma & 0 & 0 \\ \sigma & 0 & 0 & i \\ 0 & \sigma & -i & \sigma \end{pmatrix} \quad (6)$$

Damit lautet der Hamiltonoperator des Systems:

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_p (\epsilon_p - \mu) \psi_p^\dagger g_3 \psi_p + \sum_n (\epsilon_n - \mu_n) a_n^\dagger a_n + \sum_{n,n} (\epsilon_n - \mu_n) b_{n,n}^\dagger b_{n,n} \\ H_1 &= \sum_{n,p,p'} U_1(p,p') e^{-i(p-p')H_n} a_n^\dagger a_n (\psi_p^\dagger g_3 \psi_{p'}) \\ H_2 &= \sum_{n,p,p'} U_2(p,p') e^{-i(p-p')H_n} (b_n^\dagger \vec{S} b_n) \cdot (\psi_p^\dagger \vec{\alpha} \psi_{p'}) \\ \vec{\alpha} &= \{ g_3 \sigma_1, g_0 \sigma_2, g_3 \sigma_3 \} \end{aligned} \quad (3')$$

$$H_3 = - \frac{1}{2} g \sum_{p,p',q} (\psi_{p+q}^\dagger g_3 \psi_p) \cdot (\psi_{p'-q}^\dagger g_3 \psi_{p'})$$

Einige Regeln für die Anwendung des Nambu-Formalismus
sind in Anhang A zusammengestellt.

III. Berechnung der Greenschen Funktion der Elektronen.

1. Dysongleichung und Form der Selbstenergie.

Für die Greensche Funktion der Elektronen im Nambu-Formalismus gilt eine Dysongleichung in der bekannten Form:

$$\Longrightarrow = \longrightarrow + \longrightarrow \left(\sum_G \right) \Longrightarrow \quad (7)$$

Dabei ist $\Longrightarrow \equiv G(p, \omega_n)$ die exakte Greensche Funktion, $\longrightarrow \equiv G_0(p, \omega_n)$ die Greensche Funktion für freie Elektronen:

$$G_0^{-1}(p, \omega_n) = i\omega_n - \epsilon_F \cdot \xi \quad (8)$$

mit $\xi = \epsilon_p - \mu$, $\omega_n = (2n+1)\pi T$

Bei der Berechnung der Selbstenergie $\sum_G$ wollen wir folgende Beiträge berücksichtigen:

$$\left(\sum_G \right) = \text{a} + \text{b}_1 + \text{b}_2 + \text{c} \quad (9)$$

Die einzelnen Graphen haben folgende physikalische Bedeutung:

a : Streuung an nichtmagnetischen Verunreinigungen in 2. Ordnung,

b_{1,2}: Streuung an magnetischen Verunreinigungen in 1. und 2. Ordnung,

c : BCS-Wechselwirkung.

$\text{---} \text{---} \text{---} \equiv A_n(\omega_s)$ und $\text{===} \text{===} \text{===} \equiv B_{n,\eta}(\omega_s)$ sind die Propagatoren der nichtmagnetischen, bzw. magnetischen Verunreinigungen.

2. Selbstenergiebeiträge in 1. Ordnung und magnetischer Zustand des Systems.

Den Beitrag 1. Ordnung in der Wechselwirkung mit den nichtmagnetischen Verunreinigungen brauchen wir nicht explizit berücksichtigen, da er lediglich zu einer Renormalisierung des chemischen Potentials der Elektro-

nen und der Verunreinigungen führt. Die Propagatoren der nichtmagnetischen Verunreinigungen haben daher folgende Form:

$$A_n^{-1}(\omega_s) = i\omega_s - (\epsilon_1 - \mu_1) \quad \omega_s = (2s+1)\pi T \quad (10)$$

Die Wechselwirkung mit den magnetischen Verunreinigungen in 1. Ordnung (b_1) verursacht dagegen eine Polarisierung der Leitungselektronen, falls die Verunreinigungen ausgerichtet sind. Die Einstellenergie der Verunreinigungs-spins in dem Austauschfeld der polarisierten Leitungselektronen können wir andererseits als Selbstenergie der Propagatoren der magnetischen Verunreinigungen auffassen:

$$\text{---} \Rightarrow \text{---} \rightarrow + \text{---} \rightarrow \left(\sum_B \right) \text{---} \Rightarrow \text{---} \quad (11)$$

Dabei ist

$$\text{---} \rightarrow \equiv B_{n,\kappa}^0(\omega_s) = \frac{1}{i\omega_s - (\epsilon_2 - \mu_2)} \quad (12)$$

der Propagator für eine magnetische Verunreinigung ohne Wechselwirkung mit den Leitungselektronen. Im Rahmen der Molekularfeldnäherung setzen wir:

$$\left(\sum_B \right) = \text{---} \bigcirc \text{---} \quad (13)$$

Die Einstellenergie ist damit proportional zur Elektronenpolarisation (siehe Anhang A):

$$\sum_B(n,\kappa) = \mathcal{U}_2(0) S_{n,\kappa}^z \langle n_1 - n_2 \rangle \equiv \kappa \cdot \bar{\omega} \quad (14)$$

mit $\bar{\omega} = \mathcal{U}_2(0) \langle n_1 - n_2 \rangle$

Damit gilt für die Propagatoren der magnetischen Verunreinigungen:

$$B_{n,\kappa}^{-1}(\omega_s) = i\omega_s - (\epsilon_2 + \kappa \cdot \bar{\omega} - \mu_2) \quad (15)$$

Für die Selbstenergie der Elektronen im Austauschfeld der polarisierten Verunreinigungen erhalten wir analog:

$$\sum_G^{b_1}(p, \omega_n) = n_2 \mathcal{U}_2(0) \langle S_z \rangle \alpha^z \equiv \bar{I} \cdot p_z \sigma_z \quad (16)$$

Die Spinpolarisation der Verunreinigungen $\langle S_z \rangle$ und die Polarisierung der Leitungselektronen $\langle \sigma^z \rangle = \langle n_1 - n_2 \rangle$ sind wiederum Funktionen der Magnetisierungsenergien und der Temperatur. Im normalleitenden Zustand ist:

$$(17)$$

$$\langle S_z \rangle = -S \cdot B_S \left(\frac{S\bar{\omega}}{T} \right) \quad (17)$$

$$\langle \sigma^z \rangle \simeq -2 \cdot N(0) \cdot \bar{I}$$

$B_S(x)$ ist die Brillouinfunktion, $N(0)$ die Energiedichte der Elektronenzustände an der Fermikante.

Diese Gleichungen beschreiben im Rahmen der Molekularfeldnäherung den magnetischen Zustand des Systems im normalleitenden Zustand. Sie besitzen nichtverschwindende Lösungen für die Magnetisierungsenergien unterhalb der Curietemperatur

$$T_k = \frac{2}{3} S(S+1) n_2 N(0) |u_1(0)|^2 \quad (18)$$

Für $T > T_k$ sind die Verunreinigungen und Elektronen unpolarisiert. Für $T < T_k$ sind die Verunreinigungsspins ausgerichtet, und zwar für $u_1(0) < 0$ parallel, für $u_1(0) > 0$ antiparallel zur Polarisationsrichtung der Elektronenspins.

Bei der Berechnung der Elektronenspinpolarisation $\langle \sigma^z \rangle$ haben wir Beiträge höherer Ordnung in der Wechselwirkung mit den magnetischen Verunreinigungen vernachlässigt. Takano⁹⁾ hat den Beitrag 2. Ordnung abgeschätzt und fand eine Korrektur der Elektronenpolarisation von der Größenordnung $N(0)/|u_1(0)|$, die wir hier nicht berücksichtigen wollen.

3. Selbstenergiebeiträge in 2. Ordnung und BCS-Wechselwirkung.

Zur Berechnung der Selbstenergiebeiträge in 2. Ordnung und der BCS-Wechselwirkung brauchen wir einen Ansatz für die Matrix der exakten Greenschen Funktion der Elektronen. Wir wählen diesen Ansatz gleich so, daß gewisse Symmetrierelationen zwischen den Matrixkomponenten berücksichtigt sind:

$$G^{-1}(p, \omega_n) = \quad (19)$$

$$\frac{1}{2} \left\{ i\tilde{\omega}_+ (s_0 \sigma_0 + s_3 \sigma_3) - \hat{\xi}_+ (s_3 \sigma_0 + s_0 \sigma_3) + \hat{\Delta}_+ (s_2 \sigma_2 - s_1 \sigma_1) \right. \\ \left. + i\tilde{\omega}_- (s_0 \sigma_0 - s_3 \sigma_3) - \hat{\xi}_- (s_3 \sigma_0 - s_0 \sigma_3) + \hat{\Delta}_- (s_2 \sigma_2 + s_1 \sigma_1) \right\}$$

G^{-1} unterscheidet sich von G_0^{-1} im supraleitenden Zustand durch das Auftreten der Nebendiagonalelemente $\hat{\Delta}_{\pm}$. Die Verunreinigungsstreuung führt zu einer Renormalisierung der Variablen ω_n , ξ und Δ (gekennzeichnet durch $\sim$). Im magnetischen Zustand müssen wir außerdem zwischen den beiden Einstellmöglichkeiten der Elektronenspins unterscheiden (gekennzeichnet durch $\pm$). $\tilde{\omega}_{\pm}$, $\tilde{\xi}_{\pm}$ und $\hat{\Delta}_{\pm}$ sind im allgemeinen Funktionen der Variablen ω_n und p . Eine Bestimmungsgleichung für diese Funktionen erhalten wir nach Berechnung der Selbstenergie aus der Dysongleichung

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma_G \quad (7'')$$

durch Vergleich der Koeffizienten der Basismatrizen. Zur Abkürzung der weiteren Rechnungen führen wir folgende symbolische Schreibweise ein:

$$\{A_{\pm}, B_{\pm}, C_{\pm}\} = \frac{1}{2} \{ A_+ (\sigma_0 \sigma_0 + \sigma_3 \sigma_3) + B_+ (\sigma_3 \sigma_0 + \sigma_0 \sigma_3) + C_+ (\sigma_2 \sigma_2 - \sigma_1 \sigma_1) + A_- (\sigma_0 \sigma_0 - \sigma_3 \sigma_3) + B_- (\sigma_3 \sigma_0 - \sigma_0 \sigma_3) + C_- (\sigma_2 \sigma_2 + \sigma_1 \sigma_1) \} \quad (20)$$

Damit lautet der Ansatz für G^{-1} :

$$G^{-1}(p, \omega_n) = \{ i\tilde{\omega}_{\pm}, -\tilde{\xi}_{\pm}, \hat{\Delta}_{\pm} \}. \quad (21)$$

Durch Inversion erhält man daraus leicht den gesuchten Ansatz für die Matrix der Greenschen Funktion:

$$G(p, \omega_n) = \left\{ \frac{i\tilde{\omega}_{\pm}}{D_{\pm}}, \frac{\tilde{\xi}_{\pm}}{D_{\pm}}, -\frac{\hat{\Delta}_{\pm}}{D_{\pm}} \right\} \quad (22)$$

$$\text{mit } D_{\pm} = -(\tilde{\omega}_{\pm}^2 + \tilde{\xi}_{\pm}^2 + \hat{\Delta}_{\pm}^2)$$

Als 4x4-Matrix hat G folgende Gestalt:

$$G(p, \omega_n) = \begin{pmatrix} \frac{i\tilde{\omega}_+ + \tilde{\xi}_+}{D_+} & 0 & 0 & \frac{\hat{\Delta}_+}{D_+} \\ 0 & \frac{i\tilde{\omega}_- + \tilde{\xi}_-}{D_-} & -\frac{\hat{\Delta}_-}{D_-} & 0 \\ 0 & -\frac{\hat{\Delta}_-}{D_-} & \frac{i\tilde{\omega}_- - \tilde{\xi}_-}{D_-} & 0 \\ \frac{\hat{\Delta}_+}{D_+} & 0 & 0 & \frac{i\tilde{\omega}_+ - \tilde{\xi}_+}{D_+} \end{pmatrix} \quad (23)$$

Mit diesem Ansatz wollen wir nun die einzelnen Selbstenergiegraphen berechnen.

a) Streuung an nichtmagnetischen Verunreinigungen in 2. Ordnung.

$$\Sigma_G^a(p, \omega_n) \equiv \text{Diagram} \quad (24)$$

$$= -T^2 \sum_{\omega_1, \omega_2} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} |\mathcal{U}_1(p, p')|^2 A_m(\omega_1) A_m(\omega_2) \mathcal{P}_3 G(p', \omega_n + \omega_1 - \omega_2) \mathcal{P}_3$$

Führen wir zuerst die Summationen aus, dann erhalten wir bei kleinen Verunreinigungskonzentrationen:

$$\begin{aligned} \Sigma_G^a(p, \omega_n) &= n_1 \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} |\mathcal{U}_1(p, p')|^2 \mathcal{P}_3 G(p', \omega_n) \mathcal{P}_3 \\ &= n_1 \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} |\mathcal{U}_1(p, p')|^2 \left\{ \frac{i\tilde{\omega}_{\pm}}{D_{\pm}}, \frac{\tilde{\xi}'_{\pm}}{D_{\pm}}, \frac{\tilde{\Delta}_{\pm}}{D_{\pm}} \right\} \end{aligned} \quad (25)$$

Nehmen wir an, daß das Wechselwirkungsmatrixelement eine langsam veränderliche Funktion der Impulse ist, dann können wir die Impulsabhängigkeit der Selbstenergie vernachlässigen. Wir transformieren die Impulsintegration in eine Integration über die Energie $\xi' = \epsilon_{p'} - \mu$. Da der Hauptbeitrag zum Integral von dem Pol der Greenschen Funktion bei $\xi' = 0$ stammt, approximieren wir die Zustandsdichte $N(\xi')$ durch ihren Wert an der Fermikante $N(0)$ und erstrecken das Integrationsgebiet von $-\infty$ bis $+\infty$:

$$\int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \dots = \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi' N(\xi') \dots \approx N(0) \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \Big|_{|p|=p_F} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi' \dots \quad (26)$$

Diese häufig angewandte Näherung werden wir auch bei der Berechnung der folgenden Selbstenergiegraphen verwenden. Die Energieintegration läßt sich damit leicht ausführen und wir erhalten:

$$\Sigma_G^a(\omega_n) = -\frac{1}{2\tau_1} \left\{ \frac{i\tilde{\omega}_{n\pm}}{W_{n\pm}}, 0, \frac{\tilde{\Delta}_{n\pm}}{W_{n\pm}} \right\} \quad (27)$$

$$\frac{1}{\tau_1} = n_1 \frac{N(0)}{2} \int |\mathcal{U}_1(p, p')|^2 d\Omega' \Big|_{|p|=p_F}$$

$$W_{n\pm} = \sqrt{\tilde{\omega}_{n\pm}^2 + \tilde{\Delta}_{n\pm}^2}$$

b₂) Streuung an magnetischen Verunreinigungen in
2. Ordnung.

$$\sum_G b_2(p, \omega_n) \equiv \text{Diagram} \quad (28)$$

$$= -T^2 \sum_{\omega_1, \omega_2} \sum_{\ell, n, n'} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} |\mathcal{U}_2(p, p')|^2 B_{\ell, n}(\omega_1) B_{\ell, n}(\omega_2) \\ \times (S_{n, n'} \cdot \vec{\alpha}) G(p', \omega_n + \omega_1 - \omega_2) \cdot (\vec{\alpha} \cdot \vec{S}_{n', n})$$

Setzen wir $\omega_m = \omega_n + \omega_1 - \omega_2$ und summieren zuerst über ω_1 , ℓ, n, n' , dann erhalten wir bei kleinen Verunreinigungs-konzentrationen (siehe Anhang B):

$$\sum_G b_2(p, \omega_n) = n_2 \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \left[\langle S_z^2 \rangle \alpha^3 G(p', \omega_n) \alpha^3 \right. \\ \left. + T \sum_m \frac{2 \langle S_z \rangle}{i(\omega_n - \omega_m) - \bar{\omega}} \alpha^+ G(p', \omega_m) \alpha^- \right. \\ \left. + T \sum_m \frac{2 \langle S_z \rangle}{m - i(\omega_n - \omega_m) - \bar{\omega}} \alpha^- G(p', \omega_m) \alpha^+ \right] \quad (29)$$

Die Terme prop. zu $\langle S_z \rangle$ entsprechen Spinflip-Prozessen; dabei ist $\bar{\omega}$ die zwischen Elektronen und Verunreinigungen ausgetauschte Energie.

Führt man die Impulsintegration mit den gleichen Näherungen wie im Fall der nichtmagnetischen Verunreinigungen durch, dann findet man:

$$\sum_G b_2(\omega_n) = -\frac{1}{2\tau_2} \left[\langle S_z^2 \rangle \left\{ \frac{i\tilde{\omega}_{n\pm}}{W_{n\pm}}, \sigma, -\frac{\Delta_{n\pm}}{W_{n\pm}} \right\} \right. \\ \left. + 2 \langle S_z \rangle T \sum_m \left\{ \frac{1}{\pm i(\omega_n - \omega_m) - \bar{\omega}} \frac{i\tilde{\omega}_{m\mp}}{W_{m\mp}}, \sigma, \frac{-1}{\pm i(\omega_n - \omega_m) - \bar{\omega}} \frac{\hat{\Delta}_{m\mp}}{W_{m\mp}} \right\} \right] \quad (30)$$

Dabei stellt man fest, daß ein Teil der anschließenden Summationen divergiert. Diese Divergenz läßt sich vermeiden, wenn man die Austauschwechselwirkung auf Elektronenzustände in einem endlichen Energieintervall $(-D, +D)$ um die Fermikante (z.B. die Bandbreite des Leitungsbandes beschränkt.

Berücksichtigen wir das bei der Impulsintegration, indem wir für die Zustandsdichte den folgenden Ansatz machen:

$$N(\xi) = N(0) \frac{D^2}{\xi^2 + D^2}, \quad (31)$$

dann erhalten wir bei den einzelnen Summanden einen zusätzlichen Faktor der Form: $\frac{D}{W_{m\pm} + D} \simeq \frac{D}{|\omega_m| + D}$,

der bewirkt, daß die m-Summation praktisch auf das Intervall $|\omega_m| < D$ beschränkt ist.

c) BCS-Wechselwirkung.

$$\sum_G^c(\omega_n) \equiv \text{cloud} \quad (32)$$

$$= g T \sum_m \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} g_3 G(p', \omega_m) g_3 \equiv - \left\{ \{d_{\pm}, \sigma, \Delta_{\pm}\} \right\}$$

Dabei ist

$$d_{\pm} = g N(0) \pi T \sum_m \frac{\hat{\omega}_{m\pm}}{W_{m\pm}} \quad (33)$$

$$\Delta_{\pm} = g N(0) \pi T \sum_m \frac{\hat{\Delta}_{m\pm}}{W_{m\pm}}$$

Hier müssen wir ebenfalls berücksichtigen, daß nur Elektronen in einem Energieintervall $(-\omega_D, +\omega_D)$ um die Fermikante an der Wechselwirkung beteiligt sind. Das führt in analoger Weise zu einer Beschränkung der Summation auf das Intervall $|\omega_m| < \omega_D$ (Debyeenergie).

$\Delta_{\pm}$ ist der Ordnungsparameter des Elektronensystems. Durch Vergleich mit der Definition der Greenschen Funktion (23) findet man:

$$\Delta_+ = -g \langle \psi_{\uparrow} \psi_{\downarrow} \rangle, \quad \Delta_- = g \langle \psi_{\downarrow} \psi_{\uparrow} \rangle \quad (34)$$

Daraus folgt unmittelbar: $\Delta_+ = \Delta_- \equiv \Delta$

Macht man Gebrauch von der Beziehung der BCS-Theorie zwischen der Kopplungskonstanten g und der Übergangstemperatur T_{co} des reinen Supraleiters

$$\frac{1}{g N(0)} = \ln \frac{2\omega_D \gamma}{\pi T_{co}} \quad (35)$$

dann läßt sich die Gleichung für den Ordnungsparameter (33) in der folgenden Form schreiben:

$$\ln \frac{T}{T_{co}} = \pi T \sum_n \left\{ \frac{1}{\Delta} \frac{\hat{\Delta}_{n\pm}}{W_{n\pm}} - \frac{1}{|\omega_n|} \right\} \quad (36)$$

Setzt man die berechneten Terme der Selbstenergiematrix in die Dysongleichung (7) ein, dann können wir die Bestimmungsgleichungen für $\tilde{\omega}$, $\tilde{\gamma}$, $\tilde{\Delta}$ unmittelbar ablesen. (37)

$$\begin{aligned}
 \hat{\omega}_{n\pm} &= \omega_n \pm i\bar{\Gamma} + d_{\pm} + \frac{1}{2\tau_1} \frac{\hat{\omega}_{n\pm}}{W_{n\pm}} + \frac{1}{2\tau_2} \left[\langle S_z^2 \rangle \frac{\hat{\omega}_{n\pm}}{W_{n\pm}} \right. \\
 &\quad \left. + 2 \langle S_z \rangle T \sum_m \frac{1}{\pm i(\omega_n - \omega_m) - \bar{\omega}} \frac{\hat{\omega}_{m\mp}}{W_{m\mp}} \right] \\
 \hat{\Delta}_{n\pm} &= \Delta_{\pm} + \frac{1}{2\tau_1} \frac{\hat{\Delta}_{n\pm}}{W_{n\pm}} - \frac{1}{2\tau_2} \left[\langle S_z^2 \rangle \frac{\hat{\Delta}_{n\pm}}{W_{n\pm}} \right. \\
 &\quad \left. + 2 \langle S_z \rangle T \sum_m \frac{1}{\pm i(\omega_n - \omega_m) - \bar{\omega}} \frac{\hat{\Delta}_{m\mp}}{W_{m\mp}} \right] \\
 \hat{\omega}_{n\pm} &= \{
 \end{aligned}
 \tag{37}$$

Aufgrund der analytischen Eigenschaften einer thermischen Greenschen Funktion müssen $\hat{\omega}_{n\pm}$ und $\hat{\Delta}_{n\pm}$ folgende Symmetrierelationen erfüllen:

$$\hat{\omega}_{n\pm} = -(\hat{\omega}_{-n\pm})^*, \quad \hat{\Delta}_{n\pm} = (\hat{\Delta}_{-n\pm})^*
 \tag{38}$$

Daraus lassen sich mit Hilfe des Gleichungssystems (37) weitere Beziehungen ableiten:

$$\hat{\omega}_{n\pm} = (\hat{\omega}_{n\mp})^*, \quad \hat{\Delta}_{n\pm} = (\hat{\Delta}_{n\mp})^*
 \tag{38'}$$

$$d_+ = -d_- \quad \text{imaginär}$$

$$\Delta_+ = \Delta_- = \Delta \quad \text{reell.}$$

Befindet sich das System im paramagnetischen Zustand, dann vereinfachen sich die Gleichungen (37) beträchtlich:

$$\begin{aligned}
 \hat{\omega}_n &= \omega_n + \left[\frac{1}{2\tau_1} + \frac{1}{2\tau_2} S(S+1) \right] \frac{\hat{\omega}_n}{W_n} \\
 \hat{\Delta}_n &= \Delta + \left[\frac{1}{2\tau_1} - \frac{1}{2\tau_2} S(S+1) \right] \frac{\hat{\Delta}_n}{W_n}
 \end{aligned}
 \tag{39}$$

In diesem Fall lassen sich die thermodynamischen Eigenschaften des Systems, z.B. T_c , $\Delta(T)$, freie Energie, relativ leicht berechnen³⁾. Im magnetischen Zustand ist das nur für die Übergangstemperatur ohne größeren numerischen Aufwand möglich. Wir wollen uns daher bei der folgenden Diskussion auf dieses Problem beschränken.

IV. Einfluß der Spinpolarisation auf die Übergangstemperatur des Supraleiters.

Setzt man voraus, daß der Phasenübergang vom supraleitenden zum normalleitenden Zustand von 2. Ordnung ist, dann läßt sich die Übergangstemperatur T_c des Systems mit Hilfe des Grenzübergangs $\Delta \rightarrow 0$ berechnen.

Setzen wir

$$y_{n\pm} = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \frac{\hat{\Delta}_{n\pm}}{\hat{\omega}_{n\pm}}$$

dann läßt sich aus (36) die folgende Gleichung für die Übergangstemperatur ableiten:

$$\ln \frac{T_c}{T_{c0}} = 2\pi T_c \sum_{n \geq 0} \left\{ \operatorname{Re} y_{n\pm} - \frac{1}{\omega_n} \right\} \quad (40)$$

Durch geeignete Kombination der Gleichungen für $\hat{\omega}$ und $\hat{\Delta}$ (37), die im Grenzfall $\Delta \rightarrow 0$ entkoppelt sind, erhalten wir für die Funktionen $y_{n\pm}$ die Gleichungen

$$A_{n\pm} y_{n\pm} = 1 - \frac{1}{T_c} \langle S_z \rangle T_c \sum_m \frac{\operatorname{sign}(m)}{\pm i(\omega_n - \omega_m) - \bar{\omega}} y_{m\mp} \quad (41)$$

mit

$$A_{n\pm} = \hat{\omega}_{n\pm} + \frac{1}{2T_c} \langle S_z^2 \rangle \operatorname{sign}(n) - \frac{1}{2T_c} \operatorname{sign}(n) \\ = \omega_n \pm iI + \frac{1}{T_c} \langle S_z^2 \rangle \operatorname{sign}(n)$$

$$+ \frac{1}{T_c} \langle S_z \rangle T_c \sum_m \frac{\operatorname{sign}(m)}{\pm i(\omega_n - \omega_m) - \bar{\omega}} \frac{D}{|\omega_m| + D}$$

Wir sehen dabei, daß die nichtmagnetischen Verunreinigungen keinen Einfluß auf die Übergangstemperatur haben:

Wir wollen an Hand dieser Gleichungen den Einfluß der Spinpolarisation auf die Übergangstemperatur studieren.

Dazu untersuchen wir zuerst zwei Grenzfälle:

1. Unpolarisierte Verunreinigungen und Elektronen.

Setzen wir $\bar{\omega} = I = \sigma$, $S(S+1)/T_c = \Gamma$, dann ist

$$y_n = \frac{1}{\omega_n + \Gamma} \quad (n \geq 0) \quad (42)$$

Daraus folgt für die Gleichung der Übergangstemperatur:

$$\ln \frac{T_c}{T_{c0}} = 2\pi T_c \sum_{n \geq 0} \left\{ \frac{1}{\omega_n + \Gamma} - \frac{1}{\omega_n} \right\} \quad (43)$$

Die rechte Seite kann durch Digammafunktionen ausgedrückt werden:

$$\ln \frac{T_c}{T_{c0}} = \psi\left(\frac{1}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\Gamma}{2\pi T_c}\right) \quad (43')$$

T_c als Funktion des Paarbrechungsparameters Γ ist in Figur 2, a dargestellt.

2. Unpolarisierte Verunreinigungen, polarisierte Elektronen.

Dieser Fall ist hier vorwiegend von mathematischem Interesse, da im Rahmen der Molekularfeldtheorie mit der Polarisierung der Elektronen auch eine Polarisierung der Verunreinigungen verbunden ist. Er soll dazu dienen, den zusätzlichen Paarbrechungseffekt des Austauschfeldes zu zeigen.

Setzen wir $\bar{\omega} = 0$, $\bar{I} \neq 0$, dann lauten die entsprechenden Gleichungen:

$$\gamma_{n\pm} = \frac{\omega_n \mp (I + \Gamma/3)}{(\omega_n + 2\Gamma/3)^2 - (\Gamma/3)^2 + I^2} \quad b = \Gamma/3, \quad g_{\pm} = \frac{2\Gamma/3 \pm \sqrt{b^2 - I^2}}{2\pi T_c} \quad (44)$$

$$\ln \frac{T_c}{T_{c0}} = 2\pi T_c \sum_{n \geq 0} \left\{ \frac{1}{\omega_n + \Gamma + I^2/(\omega_n + \Gamma/3)} - \frac{1}{\omega_n} \right\} \\ = \psi\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{b}{\sqrt{b^2 - I^2}}\right) \psi\left(\frac{1}{2} + g_+\right) + \left(1 - \frac{b}{\sqrt{b^2 - I^2}}\right) \psi\left(\frac{1}{2} + g_-\right) \right] \quad (45)$$

In Figur 2 ist der Verlauf der Übergangstemperatur als Funktion von Γ für verschiedene Werte des Austauschfeldes dargestellt.

Sind sowohl die Elektronen als auch die Verunreinigungen polarisiert, dann läßt sich das Gleichungssystem (41) für die Funktionen $\gamma_{n\pm}$ nicht mehr explizit lösen. Da die physikalischen Ursachen des Paarbrechungseffektes der magnetischen Verunreinigungen und des inneren Feldes eng mit der Selbstenergie, d.h. der Energie und Lebensdauer der Elektronenzustände zusammenhängen, wollen wir an Hand der Gleichung (37) den Einfluß der Verunreinigungspolarisation auf die Selbstenergie untersuchen. Drücken wir die Summe im Spinflip-Term der Selbstenergie durch Digammafunktionen aus, dann lautet die Gleichung für $\tilde{\omega}_{n\pm}$:

$$\tilde{\omega}_{n\pm} = \omega_n \pm iI + \frac{1}{2\tau_1} \text{sign}(n) + \frac{1}{2\tau_2} S(S+1) \text{sign}(n) \\ \pm i \frac{\langle S_z \rangle}{\pi \tau_2} \left\{ \ln \frac{D}{2\pi T_c} - \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{|\omega_n| \pm i\tilde{\omega} \text{sign}(n)}{2\pi T_c}\right) \right\} \quad (46)$$

Der Einfluß der Spinpolarisation zeigt sich besonders deutlich

bei tiefen Temperaturen $T \ll \bar{\omega}$; dann erhalten wir:

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_{n\pm} = \omega_n \pm i \left[\bar{I} - \frac{\langle S_z \rangle}{2\pi\tau_2} \ln \frac{\bar{\omega}^2 + \omega_n^2}{D^2} \right] \\ + \frac{1}{2\tau_1} \operatorname{sign}(n) + \frac{1}{2\tau_2} \left[S(S+1) + \frac{\langle S_z \rangle}{\pi} \arctan \frac{\bar{\omega}}{|\omega_n|} \right] \operatorname{sign}(n) \end{aligned} \quad (46')$$

Im Falle einer ferromagnetischen Kopplung ($U_1(0) < 0, \bar{\omega}, \bar{I} > 0, \langle S_z \rangle < 0$) führt die Polarisierung der magnetischen Verunreinigungen und der damit verbundene Energieaustausch zwischen Verunreinigungen und Elektronen zu einer Reduzierung des Austauschfeldes und des Streueffektes der magnetischen Verunreinigungen. Wir können daraus schließen, daß auch der Paarbrechungseffekt dieser Größen entsprechend reduziert wird.

Um einen möglichst einfachen Zusammenhang zwischen den magnetischen Eigenschaften des Systems und dem Paarbrechungseffekt der magnetischen Verunreinigungen zu erhalten, wollen wir in den folgenden Rechnungen die Impulsabhängigkeit des magnetischen Streupotentials vernachlässigen. Wir setzen

$$U_1(q) = -J/N$$

mit J : Austauschintegral und N : Anzahl der Gitterbausteine pro Volumen. Verwenden wir für $N(0)$ den Wert der Zustandsdichte an der Fermikante

$$N(0) = \frac{3}{4} \frac{z \cdot N}{\epsilon_F}$$

mit z : Anzahl der Elektronen pro Gitterbaustein, dann lauten die Gleichungen (17) für die Magnetisierungsenergien und die Curietemperatur (18):

$$\begin{aligned} \bar{\omega} &= \frac{3}{2} \frac{zJ}{\epsilon_F} \bar{I} \\ \bar{I} &= C_2 J S B_s \left(\frac{S\bar{\omega}}{T} \right) \end{aligned} \quad (17')$$

$$T_k = C_2 \frac{S(S+1)}{2} z \frac{J^2}{\epsilon_F} \quad (18')$$

Für die Streuzeit erhalten wir mit dieser Näherung:

$$\frac{1}{\tau_2} = C_2 \frac{3}{2} \pi z \frac{J^2}{\epsilon_F} \quad (47)$$

Da sich der Effekt der Verunreinigungspolarisation besonders stark bei tiefen Temperaturen auswirkt, wollen

wir im folgenden die kritische Verunreinigungskonzentration berechnen, für die bei $T = 0$ der supraleitende Zustand verschwindet.

V. Berechnung der kritischen Verunreinigungskonzentration bei $T = 0$.

Für $T = 0$ läßt sich das lineare Gleichungssystem (41) in ein Integralgleichungssystem umformen. Dabei ist es vorteilhaft, folgende dimensionslose Variablen, Konstanten und Funktionen einzuführen:

$$\begin{aligned} 1. \quad 2\pi\pi\bar{T}\tau_2 &\Rightarrow x, \quad 2. \quad T\tau_2 \sum_n \Rightarrow \frac{1}{2\pi} \int dx \\ 3. \quad \frac{1}{\tau_2} y_{n\pm} \operatorname{sign}(n) &\Rightarrow y_{\pm}(x), \quad 4. \quad \tau_2 A_{n\pm} \operatorname{sign}(n) \Rightarrow A_{\pm}(x) \quad (48) \\ 5. \quad \bar{\omega} \tau_2 &\Rightarrow \frac{S}{\pi} \equiv \Omega, \quad 6. \quad \langle s_z \rangle \Rightarrow -S \end{aligned}$$

Die Integralgleichungen für die Funktionen $y_{\pm}(x)$ lauten dann:

$$A_{\pm}(x) y_{\pm}(x) = 1 \mp \frac{iS}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \frac{1}{x-x' \pm i\Omega} y_{\mp}(x') \quad (49)$$

mit $A_{\pm}(x) = |x| + S^2 + \frac{S}{\pi} \arctan \frac{|x|}{\Omega} \pm i \frac{S}{\pi} \left[I_c + \frac{1}{2} \ln \frac{x^2 + \Omega^2}{S^2(S+1)^2} \right]$

$$I_c = \frac{\pi}{S} T \tau_2 + \ln \frac{S(S+1)}{D \tau_2}$$

Aus Gleichung (40) erhalten wir für $T_c = 0$:

$$\frac{1}{2} \exp \left\{ \int_c^{\infty} dx [\operatorname{Re} y_{\pm}(x) - y^0(x)] \right\} = \frac{S(S+1)}{\tau_2 \Delta_0} \equiv c_{no} \quad (50)$$

mit $y^0(x) = \frac{1}{|x| + S(S+1)}$

Aus dem Wert von c_{no} läßt sich in einem speziellen Fall leicht die kritische Verunreinigungskonzentration berechnen:

$$c_{kv} = \frac{2}{3} \frac{T_{co} \cdot \varepsilon_F}{\gamma^2 \cdot S(S+1)} c_{no} \quad (51)$$

Im unmagnetischen Zustand ist $c_{no} = 0.5$.

Wir bemerken, daß die Funktion $y_{\pm}(x)$ außer vom Spin der Verunreinigungen nur von dem Wert des Parameters I_c abhängt, in dem sich alle Materialkonstanten zusammenfassen lassen:

$$I_c = \frac{2 \varepsilon_F}{3 \gamma^2} + \ln \left(\frac{\pi T_{co}}{\gamma D} c_{no} \right) \quad (52)$$

(Diese Größe entspricht dem Parameter α_0 bei Takano⁹⁾.
Mit den hier verwendeten Näherungen gilt:

$$-\alpha_0 = \frac{2\varepsilon_F}{3zJ} + \ln \frac{\pi T_x}{D},$$

dabei ist T_x der Schnittpunkt der Übergangstemperaturkurve mit der Curietemperatur (siehe Figur 7) $T_x \approx 0,1T_{c0}$

Wir haben die Integralgleichung (49) numerisch durch Iteration für verschiedene Werte von S und I_c gelöst und damit c_{no} berechnet (Figur 3 - 6).

Es zeigt sich, daß in einem bestimmten Wertebereich von I_c die kritische Verunreinigungskonzentration c_{no} größer als 0.5 ist. Das bedeutet, daß durch die Dynamik der polarisierten Verunreinigungsspins der Paarbrechungseffekt des inneren Feldes vollständig kompensiert wird. Die maximale Verunreinigungskonzentration wird etwa bei $I_c = 0$ erreicht. Für $D = \varepsilon_F = 2 \times 10^4 \text{ K}$, $T_{c0} = 10^6 \text{ K}$, $z = 1$ entspricht das einer ferromagnetischen Austauschwechselwirkung der Stärke $J \approx 1.7 \times 10^3 \text{ K}$

VI. Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung.

Bei der Streuung eines Elektrons an einem Verunreinigungspotential tritt im allgemeinen eine Wechselwirkung zwischen Spin und Bahn des Elektrons auf. Die Streurate dieser Wechselwirkung ist zwar sehr viel kleiner (Faktor 10^{-4}) als der Beitrag der Potentialstreuung, sie hat jedoch im Gegensatz zu dieser einen Einfluß auf die Übergangstemperatur des Supraleiters, sobald die Elektronen polarisiert sind.

Für den Wechselwirkungsoperator der Spin-Bahn-Wechselwirkung machen wir folgenden Ansatz¹³⁾:

$$H_4 = \sum_{n, p, p', s, s'} i \left(\frac{v_{so}}{p_F} \right) [\vec{p} \times \vec{p}'] e^{-i(p-p')x} a_n^\dagger a_n c_{p,s}^\dagger \vec{\sigma}_{s,s'} c_{p',s'} \quad (52)$$

Im Nambuformalismus hat dieser Operator dann die folgende Gestalt:

$$H_4 = \sum_{n, p, p'} i \left(\frac{v_{so}}{p_F} \right) [\vec{p} \times \vec{p}'] e^{-i(p-p')x} a_n^\dagger a_n (\psi_p^\dagger \vec{\alpha} \beta_3 \psi_{p'}) \quad (52')$$

Beschränken wir uns bei der Berechnung der Selbstenergie wiederum auf die 2. Ordnung (der Beitrag 1. Ordnung verschwindet), dann erhalten wir:

$$\begin{aligned} \Sigma(p, \omega_n) &\equiv \text{Diagram} \quad (53) \\ &= n_i \sum_{i, k} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \frac{|v_{so}|^2}{p_F^4} [\vec{p} \times \vec{p}']_i (\alpha_i \beta_3 G(p', \omega_n) \alpha_k \beta_3) [\vec{p} \times \vec{p}']_k \end{aligned}$$

Verwenden wir für die Greensche Funktion weiterhin den Ansatz (19), dann zeigt sich, daß die Multiplikation der Basismatrizen von G mit $\alpha_i \beta_3$ und $\alpha_k \beta_3$ zum Teil auf neue, im Ansatz von G noch nicht enthaltene Matrizen führt. Den Koeffizienten dieser Matrizen entsprechen Greensche Funktionen der Form

$$G_{12}(p, \tau) = - \langle T \{ c_{p1}(\tau) c_{p2}^\dagger(0) \} \rangle$$

Führt man die Impulsintegration mit den schon mehrfach angewandten Näherungen unter Vernachlässigung der Impuls-

abhängigkeit des Potentials $\mathcal{V}_{s0}$ durch, dann findet man:

$$\begin{aligned} \sum^{s0} \langle p, \omega_n \rangle = & -n_1 \frac{\pi}{3} N(0) |\mathcal{V}_{s0}|^2 \left\{ \left(1 + \frac{p_z^2}{p^2}\right) \left\{ \frac{i\tilde{\omega}_{n\mp}}{W_{n\mp}}, \sigma, \frac{\tilde{\Delta}_{n\mp}}{W_{n\mp}} \right\} \right. \\ & + \left(1 - \frac{p_z^2}{p^2}\right) \left\{ \frac{i\tilde{\omega}_{n\pm}}{W_{n\pm}}, 0, \frac{\tilde{\Delta}_{n\pm}}{W_{n\pm}} \right\} \\ & + \frac{p_z(p_x \cdot i p_y)}{p^2} \frac{1}{2} \left(\frac{i\tilde{\omega}_{n+}}{W_{n+}} - \frac{i\tilde{\omega}_{n-}}{W_{n-}} \right) (-i\beta_0 \sigma_2 + \beta_3 \sigma_1) \\ & \left. + \text{Terme ähnlicher Struktur} \right\} \end{aligned} \quad (54)$$

Zur Abschätzung der Größenordnung dieser anomalen Matrixelemente und ihres Einflusses auf die Haupt- und Nebendiagonalelemente bemerken wir: Ihr Beitrag ist proportional der in (55) definierten Streurate der Spin-Bahnwechselwirkung $1/\tau_{so}$, proportional der Elektronenpolarisation und verschwindet bei Mittelung über die Impulsrichtung. Das bedeutet, daß ihr Einfluß bei der Berechnung der Haupt- und Nebendiagonalelemente mit einem Ansatz für G, der diese Matrixelemente mit enthält, vernachlässigt werden kann.

Vernachlässigen wir die Impulsabhängigkeit der Selbstenergiebeiträge, wie wir das auch in anderen Fällen getan haben, indem wir über die Fermifläche mitteln, dann erhalten wir schließlich:

$$\begin{aligned} \sum^{s0} \langle \omega_n \rangle = & -\frac{1}{2\tau_{so}} \left\{ \frac{i\tilde{\omega}_{n\pm}}{W_{n\pm}}, \sigma, \frac{\tilde{\Delta}_{n\pm}}{W_{n\pm}} \right\} \\ & - \frac{1}{\tau_{so}} \left\{ \frac{i\tilde{\omega}_{n\mp}}{W_{n\mp}}, \sigma, \frac{\tilde{\Delta}_{n\mp}}{W_{n\mp}} \right\} \end{aligned} \quad (55)$$

$$\text{mit } \frac{1}{\tau_{so}} = n_1 \frac{4\pi}{9} |\mathcal{V}_{s0}|^2 N(0)$$

Wie im Fall der Streuung an magnetischen Verunreinigungen besteht der Selbstenergiebeitrag der Spin-Bahn-Wechselwirkung aus einem Anteil, der Prozessen ohne Spinflip und einem Anteil, der Prozessen mit Spinflip entspricht.

Die Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung führt in den Gleichungen (37) zu folgenden Zusätzen:

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_{n\pm} & \leftarrow \tilde{\omega}_{n\pm} + \frac{1}{2\tau_{so}} \frac{\tilde{\omega}_{n\pm}}{W_{n\pm}} + \frac{1}{\tau_{so}} \frac{\tilde{\omega}_{n\mp}}{W_{n\mp}} \\ \tilde{\Delta}_{n\pm} & \leftarrow \tilde{\Delta}_{n\pm} + \frac{1}{2\tau_{so}} \frac{\tilde{\Delta}_{n\pm}}{W_{n\pm}} + \frac{1}{\tau_{so}} \frac{\tilde{\Delta}_{n\mp}}{W_{n\mp}} \end{aligned} \quad (56)$$

Die Gleichung (41) lautet damit:

$$A_{n\pm} y_{n\pm} + \frac{1}{\tau_{s0}} \text{sign}(n) (y_{n\pm} - y_{n\mp}) = \left(1 - \frac{\langle S_z \rangle}{\tau_l} T_c \sum_m \frac{\text{sign}(m)}{m \pm i(\omega_n - \omega_m) - \bar{\omega}}\right) y_{m\mp} \quad (57)$$

Der Einfluß der Spin-Bahn-Wechselwirkung auf die Übergangstemperatur läßt sich wiederum leicht in den folgenden Grenzfällen studieren:

1. Unpolarisierte Verunreinigungen und Elektronen.

Für $\bar{\omega} = 0$, $\bar{I} = 0$ ist $y_{n+} = y_{n-}$ reell; daher hat die Spin-Bahn-Wechselwirkung in diesem Fall keinen Einfluß auf die Übergangstemperatur.

2. Unpolarisierte Verunreinigungen, polarisierte Elektronen.

Ist $\bar{\omega} = 0$, $\bar{I} \neq 0$, dann erhalten wir:

$$y_{n\pm} = \frac{\omega_n \mp i\bar{I} + \Gamma/3 + 2/\tau_{s0}}{(\omega_n + 2\Gamma/3)^2 - (\Gamma/3 - 1/\tau_{s0})^2 + \bar{I}^2} \quad (58)$$

Damit gilt für die Gleichung der Übergangstemperatur¹³⁾:

$$\ln \frac{T_c}{T_{c0}} = 2\pi T_c \sum_{n \geq 0} \left\{ \frac{1}{\omega_n + \Gamma + \bar{I}^2 / (\omega_n + \Gamma/3 + 2/\tau_{s0})} - \frac{1}{\omega_n} \right\} \quad (59)$$

$$= \psi\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{\ell}{\sqrt{\ell^2 - \bar{I}^2}}\right) \psi\left(\frac{1}{2} + p_+\right) + \left(1 - \frac{\ell}{\sqrt{\ell^2 - \bar{I}^2}}\right) \psi\left(\frac{1}{2} + p_-\right) \right]$$

mit $\ell = \Gamma/3 - 1/\tau_{s0}$, $p_{\pm} = \frac{1}{2\pi T_c} \left(2\Gamma/3 + 1/\tau_{s0} \pm \sqrt{\ell^2 - \bar{I}^2} \right)$

Daran erkennt man leicht, daß der Paarbrechungseffekt des inneren Feldes durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung reduziert wird.

3. Polarisierte Elektronen und Verunreinigungen bei sehr starker Spin-Bahn-Wechselwirkung.

Im Grenzfall $\tau_{s0} = 0$ lautet die Gleichung für die dann reelle Funktion y_n :

$$\text{Re}(A_n) \cdot y_n = 1 + \frac{\langle S_z \rangle}{\tau_l} T_c \sum_m \frac{\bar{\omega} \text{sign}(m)}{(\omega_n - \omega_m)^2 + \bar{\omega}^2} y_m \quad (60)$$

Da $\text{Re}(A_n)$ das Austauschfeld nicht enthält, hat es in diesem Grenzfall auch keinen Einfluß auf die Übergangstemperatur. Wir können daher erwarten, daß sich die Reduktion des Paarbrechungseffektes der magnetischen Ver-

unreinigungen aufgrund der Verunreinigungspolarisation bei starker Spin-Bahn-Wechselwirkung besonders deutlich bemerkbar macht. Diese Vermutung wird durch die Berechnung der kritischen Verunreinigungskonzentration bei $T_c = 0$ bestätigt. Setzen wir $\alpha = \bar{\tau}_i / \bar{\tau}_0$, dann lauten die entsprechenden Integralgleichungen für die Funktionen $y_{\pm}(x)$ bei $T_c = 0$:

$$A_{\pm}(x) y_{\pm}(x) + \alpha (y_{\pm}(x) - y_{\mp}(x)) = 1 \mp i \frac{S}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \frac{1}{x - x' \pm i\Omega} y_{\mp}(x') \quad (61)$$

bezw. für $\alpha \rightarrow \infty$

$$Re(A(x)) \cdot y(x) = 1 - \frac{S}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \frac{\Omega}{(x - x')^2 + \Omega^2} y(x') \quad (61')$$

Die Ergebnisse für die damit berechnete kritische Verunreinigungskonzentration c_{no} mit $\alpha = 10, \infty$ sind ebenfalls in Figur 3 - 6 dargestellt.

VII. Möglichkeit der Koexistenz von Supraleitung und Ferromagnetismus.

Wir haben gesehen, daß im paramagnetischen Zustand die Übergangstemperatur des Supraleiters monoton mit der Konzentration c_2 der magnetischen Verunreinigungen fällt (Figur 2,a). Andererseits ist im Rahmen der Molekularfeldtheorie die ferromagnetische Curietemperatur prop. zu c_2 , wenn sich das System im normalleitenden Zustand befindet. Die beiden Übergangstemperaturkurven schneiden sich bei der Temperatur $T_x \approx 0.1 T_{co}$ (siehe Figur 7). Gorkov und Rusinov¹³⁾ haben die Temperatur des magnetischen Übergangs im supraleitenden Gebiet unter Vernachlässigung der Spindynamik ($\bar{\omega} = 0, \bar{I} \neq 0$) untersucht. Sie fanden einen sehr steilen Abfall der Curietemperatur direkt unterhalb T_x und einen Anstieg prop. zu c_2^2 bei kleinen Verunreinigungskonzentrationen. Durch den Paarbrechungseffekt des bei tiefen Temperaturen sehr starken inneren Feldes hat die Übergangstemperaturkurve T_c im magnetischen Gebiet eine positive Steigung (Figur 7,b). Das bedeutet, daß eine Koexistenz von Supraleitung und Ferromagnetismus allenfalls bei sehr kleinen Verunreinigungskonzentrationen möglich ist und die Annahme, daß beide Phasenübergänge im ganzen Gebiet von 2. Ordnung sind, nicht richtig sein kann. Durch den Einfluß der Spin-Bahn-Wechselwirkung kann der Paarbrechungseffekt des Austauschfeldes so weit reduziert werden, daß sich T_c dem Verlauf im paramagnetischen Zustand annähert (Figur 7,a), wodurch eine Koexistenz für alle Temperaturen unterhalb T_x möglich wird.

Die Untersuchungen von Takano⁹⁾ und diese Arbeit zeigen nun, daß schon allein durch die Dynamik der polarisierten Verunreinigungsspins der Koexistenzbereich sogar über die paramagnetische Grenzkurve hinaus erweitert sein kann (Figur 7,c).

VII. Schlußbemerkungen.

In dieser Arbeit sind eine Reihe wichtiger Fragen offen-
geblieben - sowohl beim Problem der Koexistenz von Supra-
leitung und Ferromagnetismus als auch bei der Untersu-
chung des Paarbrechungseffektes der magnetischen Ver-
unreinigungen.

Nimmt man einmal an, daß die Modellvorstellungen zur
Beschreibung des supraleitenden und magnetischen Zu-
standes richtig sind, dann erfordert die Frage nach der
Koexistenz beider Phasen noch eine genauere Untersuchung
der Art der Phasenübergänge und des Verlaufs der Curie-
temperatur im supraleitenden Gebiet unter Berücksich-
tigung der Spindynamik.

Bei der Berechnung des Paarbrechungseffektes der mag-
netischen Verunreinigungen haben wir uns auf Beiträge
in 2. Ordnung der Störungstheorie beschränkt, so daß
in diesen Ergebnissen der Einfluß des Kondoeffektes
nicht enthalten ist.

Die verwendete Molekularfeldtheorie ist sicher eine
sehr rohe Näherung zur Beschreibung des magnetischen
Zustandes einer Legierung mit magnetischen Verunreini-
gungen. Sie reicht auch nicht aus, um z.B. die Experi-
mente von Matthias zu erklären, bei denen die charakte-
ristischen Abweichungen im Verlauf der Übergangstempe-
ratur schon oberhalb des durch Suszeptibilitätsmessungen
angedeuteten magnetischen Übergangs liegen. Sicher wer-
den auch im paramagnetischen Zustand Fluktuationen
innerer Felder auftreten, die einen Einfluß auf die
Übergangstemperatur besitzen.¹⁴⁾

Zur Klärung aller dieser Fragen wäre es sehr wünschens-
wert, an weiteren supraleitenden Legierungen nicht nur
Übergangstemperatur und kritische Magnetfelder, son-
dern auch Suszeptibilität, magnetisches Moment, spezi-
fische Wärme und Restwiderstand zu messen, um Aufschluß
über die Art des Phasenübergangs und des magnetischen
Zustands der Verunreinigungen und des Systems zu gewinnen.

Anhang A: Regeln zur Anwendung des Nambuformalismus.

In Teil II hatten wir bestimmte Elektronenfeldoperatoren zu 4-dim. Nambuspino ren zusammengefaßt:

$$\psi_p = \begin{pmatrix} c_{p\uparrow} \\ c_{p\downarrow} \\ c_{-p\uparrow}^\dagger \\ c_{-p\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \psi_p^\dagger = (c_{p\uparrow}^\dagger, c_{p\downarrow}^\dagger, c_{-p\uparrow}, c_{-p\downarrow}) \quad (A1)$$

Prüft man die Vertauschungsregeln für die einzelnen Spinorkomponenten nach, dann findet man:

$$\begin{aligned} \{\psi_p^{\mu}, \psi_{p'}^{\nu}\}_+ &= \delta_{pp'} \delta_{\mu\nu}, \text{ aber} \\ \{\psi_p^{\mu}, \psi_{p'}^{\nu}\}_+ &\neq 0 \quad \text{für } p' = -p \\ &\quad \text{und } (\mu, \nu) = (1, 3); (3, 1); (2, 4); (4, 2) \end{aligned} \quad (A2)$$

Ersetzt man in dem im Nambu-Raum formulierten Hamiltonoperator des Elektronensystems die Nambu-Spinoren durch ihre Komponenten, dann stellt man fest, daß die 1-Teilchenoperatoren das doppelte Gewicht, die 2-Teilchenoperatoren das vierfache Gewicht im Vergleich zu (3) besitzen. Außerdem treten Zusatzterme auf.

Beispiel:

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_{n, p, p'} u_1(p, p') e^{-i(p-p')x_n} a_n^\dagger a_n (\psi_p^\dagger \sigma_3 \psi_p) \\ &= \sum_{n, p, p'} u_1(p, p') e^{-i(p-p')x_n} a_n^\dagger a_n (c_{p,1}^\dagger c_{p,1} - c_{-p,1}^\dagger c_{-p,1}) \end{aligned}$$

Mit $u_1(p, p') = u_1(-p', p)$ erhält man daraus:

$$H_1 = \sum_{n, p, p'} u_1(p, p') e^{-i(p-p')x_n} a_n^\dagger a_n (2c_{p,1}^\dagger c_{p,1} - \delta_{p,p'})$$

Eine Mehrfachzählung der Wechselwirkung bei der störungstheoretischen Entwicklung der Greenschen Funktion läßt sich jedoch dadurch vermeiden, daß man nur Erwartungswerte der Form $\langle \psi_p^\mu \psi_p^\nu \rangle$ zuläßt und alle übrigen Kontraktionen gleich Null setzt. Entsprechend erhält man die richtige Zeitabhängigkeit der Spinorkomponenten

$$\psi_p^\mu(\bar{t}) = e^{H\bar{t}} \psi_p^\mu(0) e^{-H\bar{t}},$$

wenn man im Gegensatz zu (A2) die folgenden Vertauschungsregeln fordert:

$$\{\psi_p^{\mu}, \psi_{p'}^{\nu}\}_+ = \delta_{pp'} \delta_{\mu\nu}$$

$$\{\psi_p^{\mu}, \psi_{p'}^{\nu}\}_+ = 0, \quad \{\psi_p^{\mu}, \psi_{p'}^{\nu}\} = 0 \quad (\text{A2'})$$

Beispiel: $e^{H_0\tau} \psi_p^{\mu} e^{-H_0\tau} = e^{-(\epsilon_p - \mu)\tau} \psi_p^{\mu}$

Auf diese Weise lassen sich die Feynmanschen Graphenregeln nahezu unverändert auch im Nambuformalismus anwenden. Für jede geschlossene Elektronenlinie ist jedoch zusätzlich der Faktor $1/2$ einzusetzen.

Beispiel:

$$\begin{aligned} \Sigma_B(n, \kappa) &\equiv \text{Diagram} = \frac{1}{2} \sum_P \sum_{\mu, \nu} \langle \psi_p^{\mu} \psi_p^{\nu} \rangle \alpha_{\mu\nu}^z S_{n\kappa}^z U_z(0) \\ &= \langle n_{\uparrow} - n_{\downarrow} \rangle \cdot S_{n\kappa}^z U_z(0) \end{aligned}$$

Anhang 3: Auswertung von Selbstenergiendiagrammen mit Verunreinigungspropagatoren.

Als Beispiel für die Berechnung von Selbstenergiendiagrammen mit Verunreinigungspropagatoren wollen wir den Beitrag 2. Ordnung der Streuung an polarisierten magn. Verunreinigungen (28) genauer untersuchen.

Setzen wir $S^\pm = S_x \pm i S_y$, $\alpha^\pm = \frac{1}{2}(\alpha^x \pm i \alpha^y)$, dann läßt sich $\sum \epsilon_i$ in folgender Weise in Spinflip- und Nicht-Spinflip-Anteile zerlegen:

$$\begin{aligned} \sum \epsilon_i(p, \omega_n) = & -T \sum_{\omega_1, \omega_m} \sum_{e, n, n'} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} |\mathcal{U}_i(p, p')|^2 \times \\ & \times B_{e, n}(\omega_1) B_{e, n'}(\omega_1 + \omega_n - \omega_m) \times \{ S_{n, n'}^+ S_{n', n}^+ (\alpha^\pm G(p', \omega_m) \alpha^\pm) \\ & + S_{n, n'}^- S_{n', n}^+ (\alpha^\pm G(p', \omega_m) \alpha^\mp) + S_{n, n'}^+ S_{n', n}^- (\alpha^\mp G(p', \omega_m) \alpha^\pm) \} \end{aligned} \quad (B1)$$

Summieren wir über ω_1 , dann erhalten wir mit $\lambda = \epsilon_i - \mu_i$:

$$\begin{aligned} & T \sum_{\omega_1} B_{e, n}(\omega_1) B_{e, n'}(\omega_1 + \omega_n - \omega_m) \\ & = \begin{cases} -\beta \frac{e^{\beta(\lambda + \bar{\omega}_n)}}{(e^{\beta(\lambda + \bar{\omega}_n)} + 1)^2} d_{n, m} & n' = n \\ -\left(\frac{1}{e^{\beta(\lambda + \bar{\omega}_{n'})} + 1} - \frac{1}{e^{\beta(\lambda + \bar{\omega}_n)} + 1} \right) \frac{1}{(\omega_n - \omega_m) - \bar{\omega}(n - n')} & n' \neq n \end{cases} \end{aligned} \quad (B2)$$

Im Falle kleiner Verunreinigungskonzentrationen ist $\beta\lambda \gg 1$, so daß wir die Fermifunktionen durch Boltzmannfunktionen ersetzen können. Damit lassen sich die Summationen über die Spinmatrixelemente durch thermische Erwartungswerte ausdrücken:

$$\begin{aligned} & T \sum_{\omega_1, e, n, n'} B_{e, n}(\omega_1) B_{e, n'}(\omega_1 + \omega_n - \omega_m) S_{n, n'}^+ S_{n', n}^+ \\ & = -d_{n, m} \langle S_z^2 \rangle \sum_{n, e} e^{-\beta(\lambda + \bar{\omega}_n)} = -d_{n, m} \langle S_z^2 \rangle n_2 \\ & T \sum_{\omega_1, e, n, n'} B_{e, n}(\omega_1) B_{e, n'}(\omega_1 + \omega_n - \omega_m) S_{n, n'}^+ S_{n', n}^- \\ & = \frac{\langle S^+ S^+ \rangle (1 - e^{\mp \beta \bar{\omega}})}{i(\omega_n - \omega_m) \mp \bar{\omega}} \sum_{n, e} e^{-\beta(\lambda + \bar{\omega}_n)} = -n_2 \frac{2 \langle S_z \rangle}{\pm i(\omega_n - \omega_m) - \bar{\omega}} \end{aligned} \quad (B3)$$

Die Propagatoren für die magnetische Anregung einer Verunreinigung $2 \langle S_z \rangle / (\pm i \omega_s - \bar{\omega})$ lassen sich auch direkt mit Hilfe der Zeitabhängigkeit der Spinoperatoren berechnen.

$$\begin{aligned} S^\pm(\tau) &= e^{\pm i \bar{\omega} \tau} S^\pm(0) \\ \langle T \{ S^\mp(\tau) S^\pm(0) \} \rangle &= T \sum_s e^{-i \omega_s \tau} \frac{2 \langle S_z \rangle}{\pm i \omega_s - \bar{\omega}}, \quad \omega_s = 2s\pi T \end{aligned} \quad (B4)$$

Herrn Prof.Dr. P. Fulde danke ich herzlich für die Anregung und Förderung dieser Arbeit.

Herrn Prof. Dr. H. Bilz danke ich für die Aufnahme in seine Gruppe.

Mein besonderer Dank gilt den Herren Dipl. Phys. R. Benda und H. Engler, die in häufigen Diskussionen zur Klärung vieler Probleme beigetragen und mich bei der Erstellung der Maschinenprogramme unterstützt haben.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für die Bereitstellung der Gelder zur Durchführung der numerischen Rechnungen am Rechenzentrum in Darmstadt.

Literaturverzeichnis

- 1) siehe z.B. Kl. Schwidtal, Z.Physik 153,563(1960)
für weitere Literaturhinweise
- 2) B.T.Matthias, H.Suhl, E.Corenzwit, Phys.Rev.Lett.
1,92(1958)
1,449,(1958)
- 3) A.A.Abrikosov, L.P.Gorkov, JETP3,1090(1959)
JETP12,1243(1961)
- 4) M.A.Woolf, F.Reif, Phys.Rev. 137, A557(1965)
- 5) R.A.Hein, R.L.Falge, B.T.Matthias, E.Corenzwit
Phys.Rev.Lett. 2,500(1959)
- 6) J.E.Crow, R.D.Parks, Phys.Lett. 21,378(1966)
- 7) B.T.Matthias, J.Appl.Phys. 31,23S(1960)
R.M.Bozorth, D.D.Davis, A.J. Williams
Phys.Rev. 119,1570(1960)
D.K.Finnemore, D.C.Hopkins, P.E.Palmer
Phys.Rev.Lett. 15,891(1965)
- 8) K.H.Bennemann, Phys.Rev.Lett. 17,438(1966)
- 9) F.Takano, Prog.Theor.Phys. 36,1095(1966)
- 10) W.Götze, W.Brenig, private Mitteilung
- 11) A.A.Abrikosov, JETP 21,660(1965)
Physics 2,5(1965)
- 12) V.Ambegaokar, A.Griffin, Phys.Rev. 137,A1151(1965)
K.Maki, P.Fulde, Phys.Rev. 140,A1586(1965)
- 13) L.P.Gorkov, A.I.Rusinov, JETP 19,922(1964)
P.Fulde, K.Maki, Phys.Rev. 141,275(1965)
- 14) R.Benda, Dissertation, Universität Frankfurt a.M.

Erklärung der Figuren

Figur 1:

Übergangstemperatur T_C des Supraleiters und magnetische Übergangstemperatur T_K in $\text{La}_{1-x}\text{Gd}_x$ - Legierungen.

Experimentelle Ergebnisse von Matthias und Mitarbeitern^{2), 5)}

O : T_C , □ : T_K

— : Theoretische Kurve von Abrikosov und Gorkov³⁾,
angepaßt bei kleinen Verunreinigungskonzentrationen, $\frac{1}{T_s} = \frac{S(S+1)}{T_s}$.

Figur 2:

Paarbrechungseffekt des inneren Feldes I, $\eta = 3 \cdot I \cdot \frac{S(S+1)}{T_s}$

a: Theorie von Abrikosov und Gorkov³⁾, $\eta = 0$

b: $\eta = 1$

c: $\eta = 2$

Figur 3 - 6:

Kritische Verunreinigungskonzentration bei $T = 0$ als Funktion des Austauschfeldparameters I_C

$$I_C = \frac{2E_F}{3+7} + \ln\left(\frac{\pi}{8} \frac{T_C}{D} C_{n0}\right), \quad C_{n0} = \frac{S(S+1)}{T_s \Delta_0}, \quad \alpha = T_s/T_{s0}$$

Figur 7:

Möglicher Koexistenzbereich von Supraleitung und Verunreinigungsferromagnetismus.

T_C : Übergangstemperatur des supraleitenden Zustandes

a: für paramagnetische Verunreinigungen³⁾

b: mit innerem Feld¹³⁾

c: mit Spindynamik und Spin-Bahn-Wechselwirkung

T_K : Curietemperatur¹³⁾

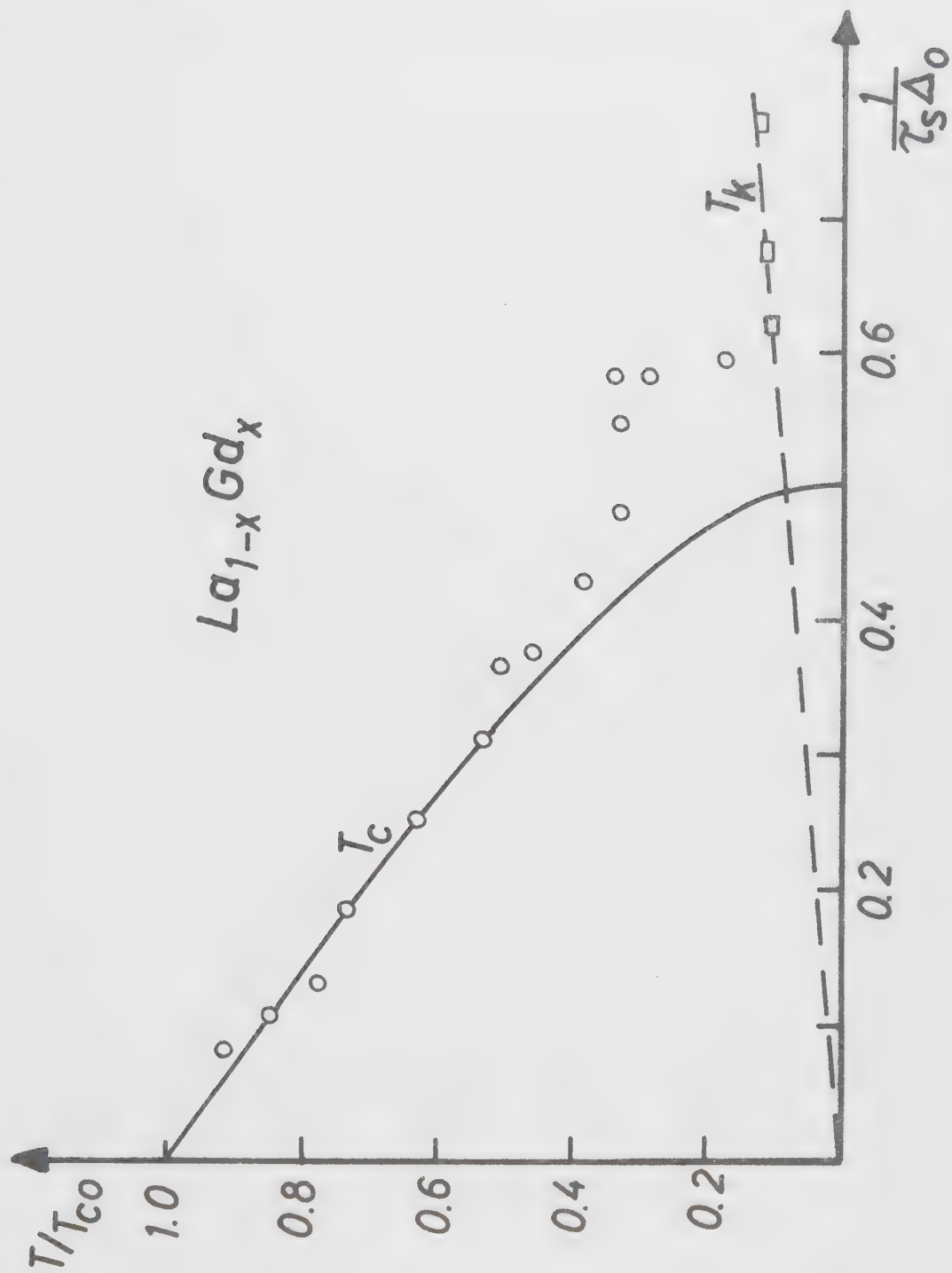


Fig.1

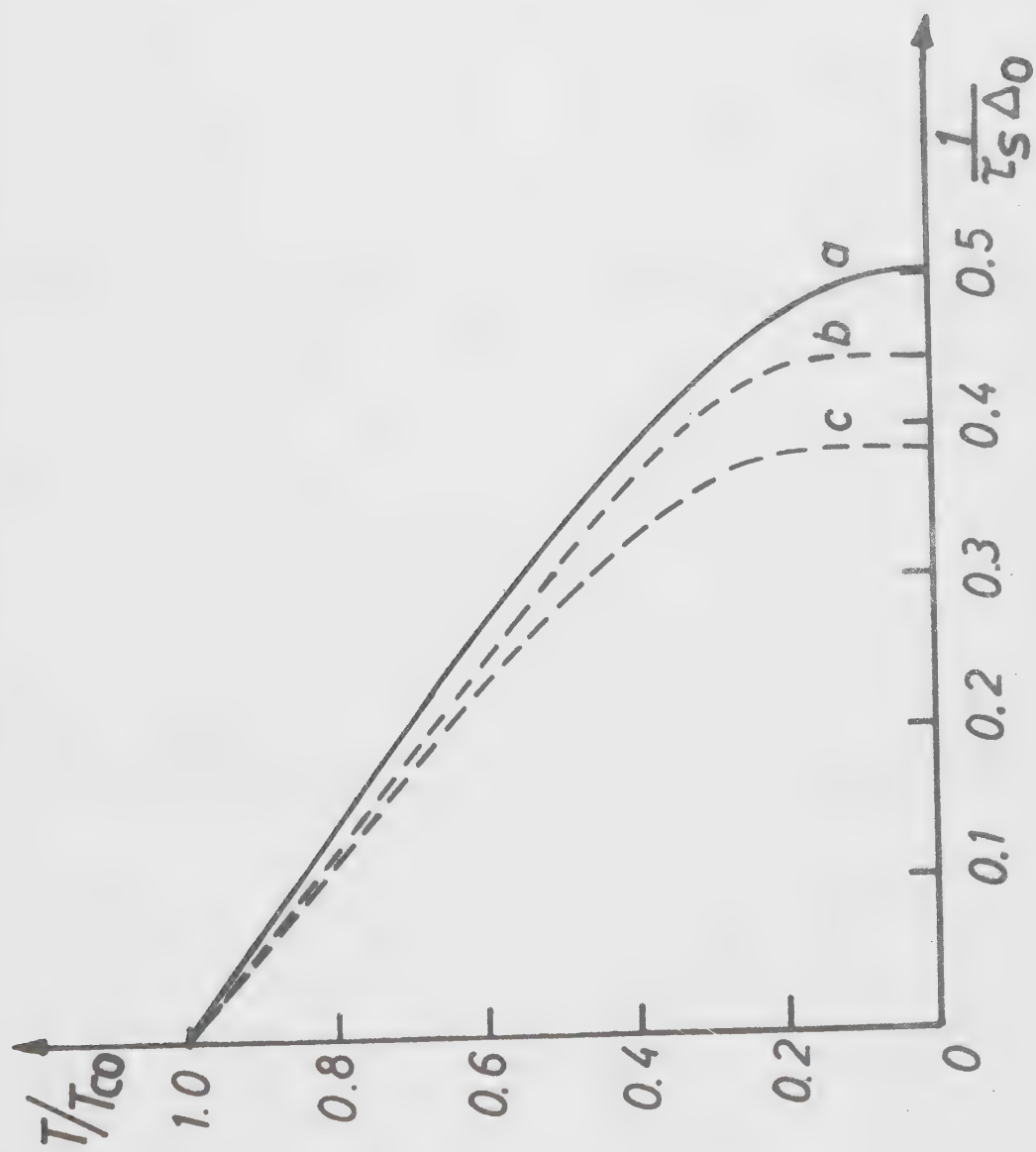


Fig. 2

Fig.3 $S=1/2$

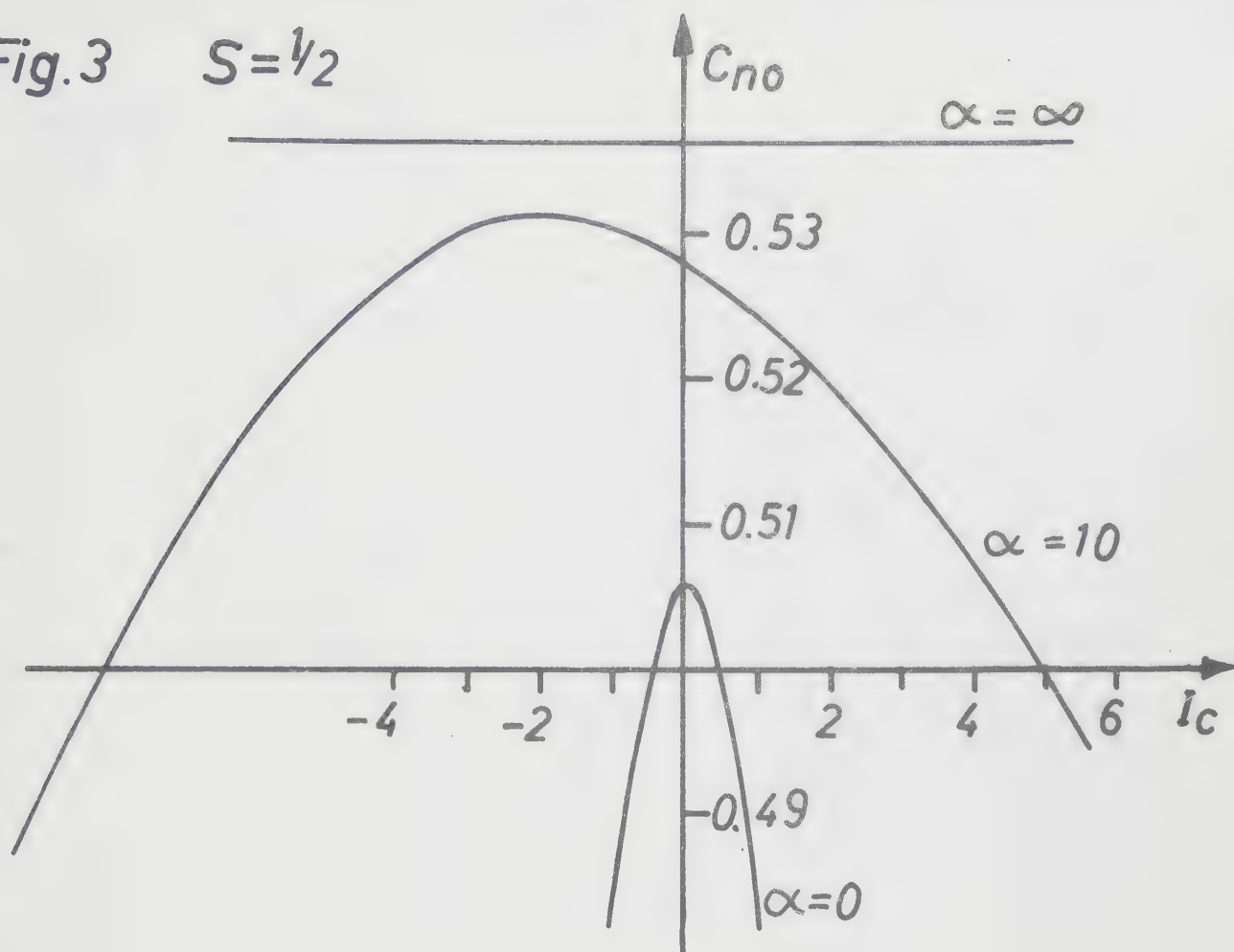


Fig.4 $S=1$

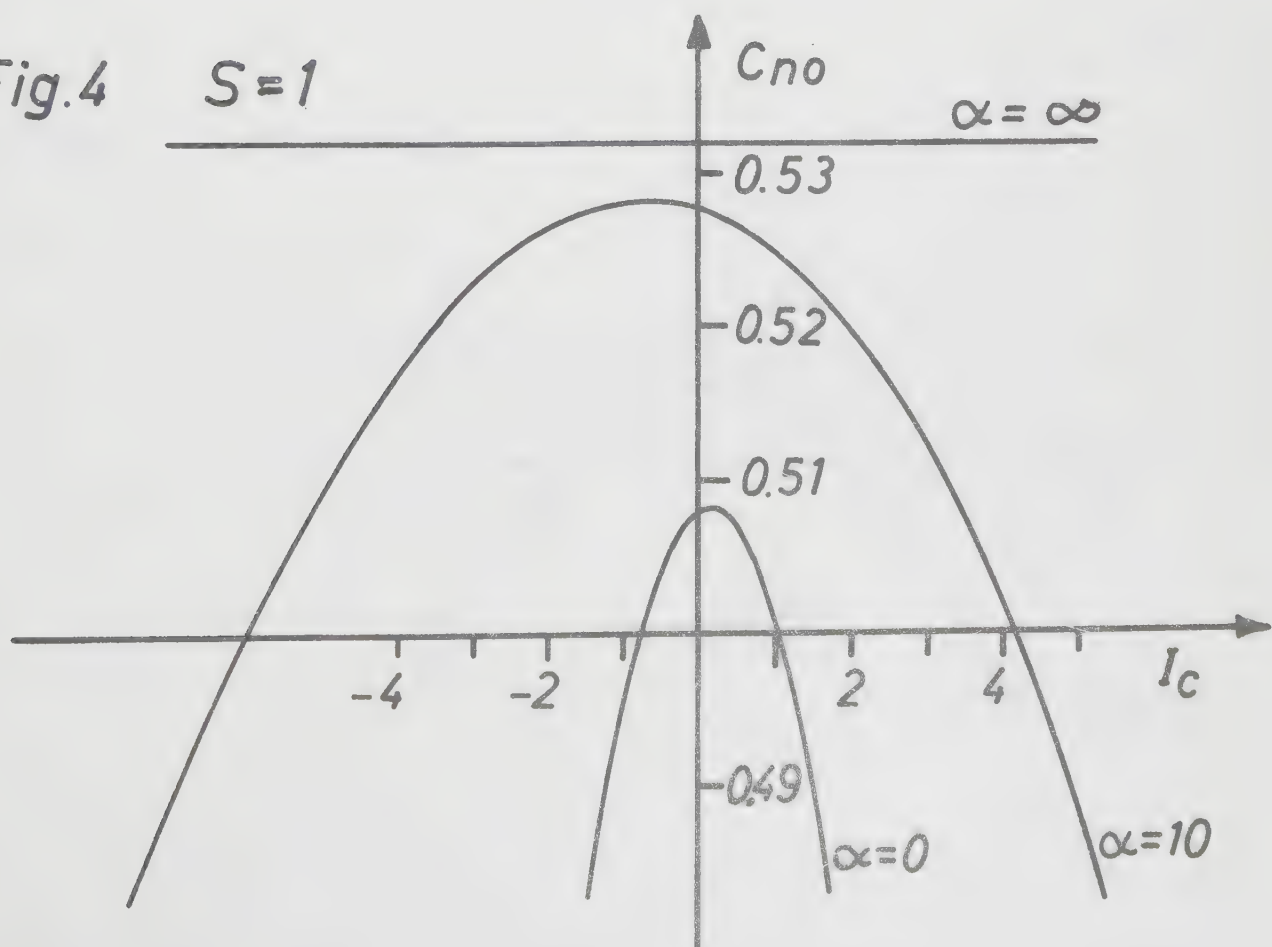


Fig. 5 $S = 3/2$

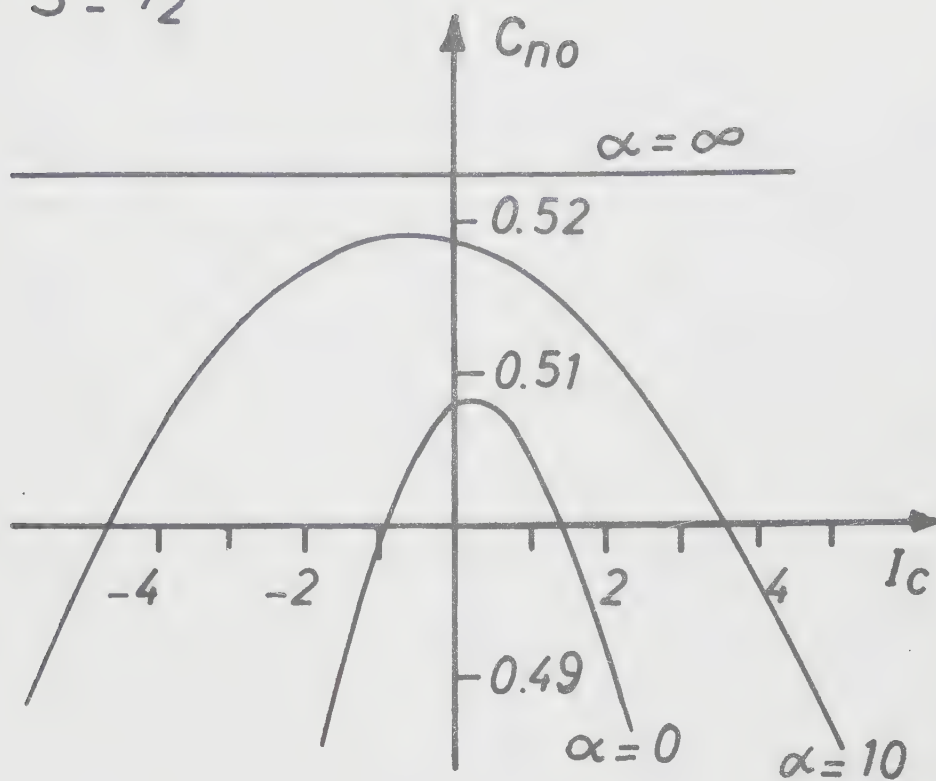
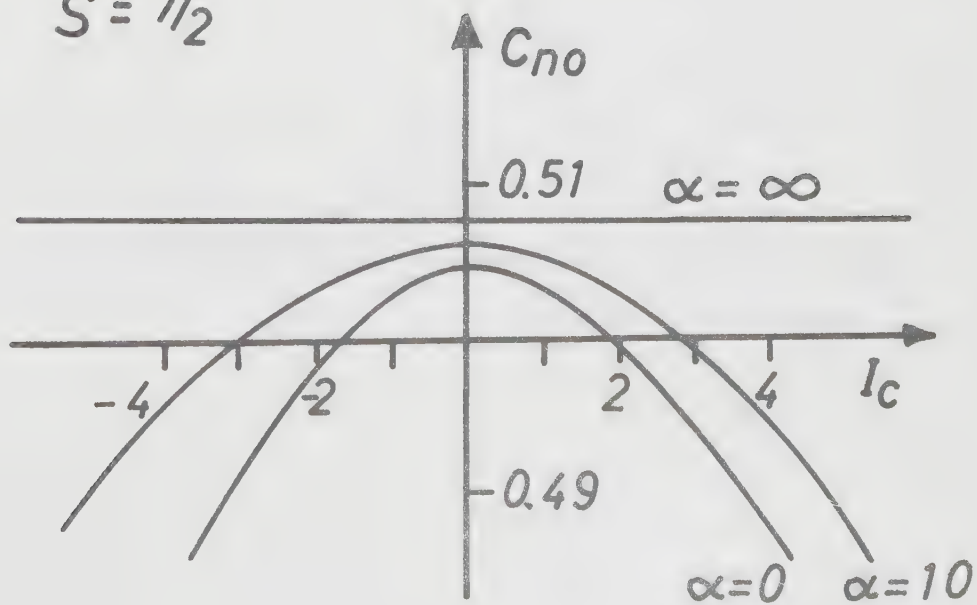


Fig. 6 $S = 7/2$



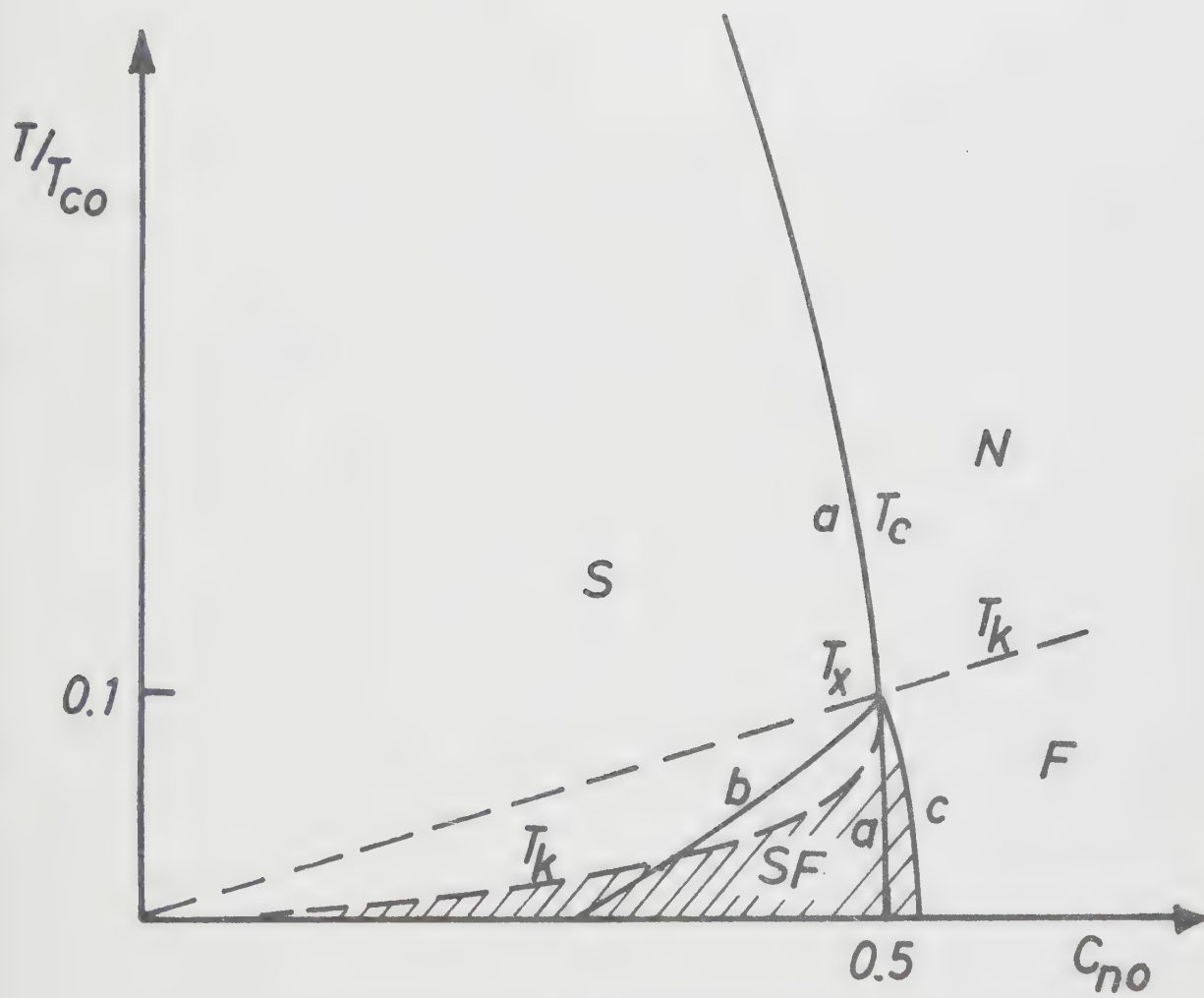


Fig.7

Meine akademischen Lehrer waren die Herren Professoren
Dr. Bilz, Flügge, Fulde, Franz, Genzel, Hönl, Marschall,
Mrowka, Osberghaus, Steinwedel.

Lebenslauf

Am 12.6.1939 wurde ich, Joachim Keller, als Sohn des Dipl. Chem. Dr. Helmut Keller und seiner Ehefrau Rosemarie geb. Auer in Eltville, Rheingau, geboren.

Meine Kindheit verbrachte ich in Oestrich, Rheingau, und in Jena.

Von 1946 bis 1959 besuchte ich die Volksschule in Oestrich, anschließend das Realgymnasium in Geisenheim, wo ich im Frühjahr 1959 mein Abitur machte.

Nach einjähriger Dienstzeit bei der Bundeswehr begann ich mit dem Studium der Physik an der Universität Frankfurt a.M. Im Mai 1962 legte ich die Diplom-Vorprüfung ab. Anschließend studierte ich an der Universität Freiburg im Breisgau und schrieb unter der Leitung von Prof. Dr. S. Flügge eine Diplomarbeit über Elektronenstreuung an Wasserstoffatomen.

Seit meiner Diplom-Hauptprüfung im März 1966 arbeite ich am Institut für Theoretische Physik der Universität Frankfurt über Verunreinigungen in Metallen und Supraleitern.

Im Oktober 1963 habe ich geheiratet. Während meiner Studienzeit bis zum Diplom war ich Stipendiat der Studienstiftung des deutschen Volkes.
